

УДК 536.872.76

Ірина Михайлюк, к.т.н., доц., Галина Левицька, Тетяна Ваврик

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, Україна

ОЦІНКА ПИТОМОГО ЕЛЕКТРООПОРУ БІНАРНИХ РОЗПЛАВІВ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ СТРУКТУРНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

Iryna Myhajluk, Ph.D., Assoc. Prof., Galyna Levytska, Tetjana Vavryk

EVALUATION OF ELECTRICAL RESISTIVITY OF BINARY FUSION ACCORDING TO THE RESULTS OF STRUCTURAL STUDIES

В рамках моделі Фабера-Займана обчислення питомого електроопору розплавів електричних систем Cd-Pb і Cd-Zn, а також розплавів системи Cu-Sb, рівноважна діаграма, стан якої характеризується хімічними сполуками і евтетикою $\text{Cu}_2\text{Si}+\text{Sb}$ при 63 ат.% Sb [1]. При обчисленні ρ розплавів Cd-Pb(Zn) використовувались псевдопотенціали Хейне-Абаренкова і модельний потенціал порожньої серцевини Ашкрофта, форма якого визначається співвідношенням:

$$U(q) = -\frac{4\pi Z}{q^2 \Omega} \cos(q R_e),$$

де Z – валентність іона метала, \vec{q} – хвильовий вектор, Ω – атомний об'єм, R_e – радіус порожньої серцевини.

При оцінці $U(q)$ враховувались екранування в наближенні Хартрі [2].

Для обчислення питомого електроопору розплавів Cu-Sb використовувались псевдопотенціали Харрисона і Краско-Гурского [3]. Необхідні парціальні структурні фактори $a_{ij}(k)$ розплавів Cd-Pb(Zn) оцінені аналізом експериментальних структурних факторів за допомогою моделі сортового ближнього порядку. Для розплавів Cu-Sb приймалися, що функції $a_{11}(k)$ і $a_{22}(k)$ є адекватні структурному фактору чистих міді і сурми, а парціальний структурний фактор $a_{12}(k)$ визначився згідно співвідношення для повного $a(k)$ двокомпонентного розплаву. Теоретично обчислені значення питомого електроопору співставлено експериментальними результатами. З'ясувалось, що на теоретичних кривих $\rho = \rho(c)$ розплавів Cd-Pb і Cd-Zn відсутні екстримальні точки, які характерні хімічним сполукам і фазам із значною взаємодією різносортних атомів. Побудовані ізотерми електроопору розплавів Cu-Sb якісно і кількісно узгоджують з експериментальними кривими $\rho(c)$. Максимум електроопору при 33 ат.% Sb вказує на наявність в ближній координації мікрообластей із структурою хімічних сполук.

Перелік посилань

1. Ziman J.M. A theory of the electrical properties of liquid metals // Phil. Mag. – 1961. – 6, No 68. – P. 1013–1034.
2. Фреїк Д.М. Технологічні аспекти нанокластерних та нанокристалічних структур / Д.М. Фреїк, Б.П. Яцишин // Фізика і хімія твердого тіла – 2007. – 8 (1), С. 7–24.
3. Гурский З.А. Псевдопотенциал переходных металлов / З.А Гурский // Физ.мет. и металловедение – 1980.– т.50, вып.5, С. 928-937.